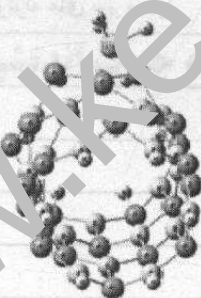


جذب گاز آرسین بر روی نانولوله های بور فسفید

مؤلف

فاطمه علی پور زاغمرزی



۱۳۹۸

سرشناسه	: علی پور زاغمرزی، فاطمه، ۱۳۵۸-
عنوان و نام پدیدآور	: جذب گاز آرسین بر روی نانولوله های بور فسفید/مؤلف فاطمه علی پور زاغمرزی.
مشخصات نشر	: نکا: جامخانه، ۱۳۹۸.
مشخصات ظاهری	: ۸۸ ص: ۲۲×۲۹ س.م.
شابک	: ۹۷۸-۶۲۲-۶۶۲۷۴۳-۶: ریال ۲۰۰۰۰
وضعیت فهرست نویسی	: فیبا
یادداشت	: شیمی محاسباتی - نانولوله های غیر کربنی
موضوع	: نانولوله ها
موضوع	: Nanotubes
موضوع	: ترکیب های بور
موضوع	: Boron Compounds
موضوع	: طیف نمایی تشدید مغناطیسی هسته ای
موضوع	: Nuclear magnetic resonance spectroscopy
موضوع	: گازها -- جذب و جذب سطحی
موضوع	: Gases -- Absorption and adsorption
موضوع	: ارسنیک تری اکسید
موضوع	: Arsenic trioxide
رده بندی کنگره	: TA۴۱.۹
رده بندی دیویی	: ۶۲۰/۵
شماره کتابشناسی ملی	: ۶۰۲۹۹۴۷

نام کتاب: جذب گاز آرسین بر روی نانولوله های بور فسفید

مؤلف: فاطمه علی پور زاغمرزی

نشر: جامخانه

صفحه آرا و طراح جلد: آسیه بنائیان

نوبت چاپ و سال چاپ: اول - ۱۳۹۸

شمارگان: ۵۰۰ نسخه

چاپ و صحافی: پارت

قیمت: ۲۰۰۰۰ تومان

شابک: ۹۷۸-۶۲۲-۶۶۲۷-۴۳-۶

کلیه حقوق این کتاب برای ناشر محفوظ است.

jamkhaneh.publish.۹۷@gmail.com

تلفن: ۰۱۱۳۴۷۴۸۵۷۲ - ۰۹۱۱۲۵۲۲۷۱۹

آدرس: مازندران. نکا. خیابان انقلاب. پاساژ بزرگ. کد پستی ۴۸۴۱۸۶۴۸۷۷

فصل اول

قسمت اول : شیمی محاسباتی

۱-۱-۱- پیش درآمد.....	۱۳
۱-۱-۲- آنچه از شیمی محاسباتی باید دانست.....	۱۴
۱-۱-۳- نگاهی گذرا به روشهای شیمی محاسباتی.....	۱۴
۱-۳-۱- روش نظریه تابعیت چگالی.....	۱۴
۱-۳-۱-۱- تئوری روش تابعیت چگالی.....	۱۵
۱-۳-۱-۲- معادلات کوهن-شم.....	۱۷
۱-۳-۱-۳- اوربیتال های کوهن-شم.....	۱۹
۱-۴-۱- انواع مجموعه پایه.....	۲۱
۱-۴-۱-۱- مجموعه پایه پلاریز.....	۲۱

قسمت دوم : طیف سنجی تشدید مغناطیسی هسته

۱-۲-۱- طیف سنجی تشدید مغناطیس هسته.....	۲۴
۱-۲-۲- هسته در حضور یک میدان مغناطیسی یخوخت.....	۲۵
۱-۲-۳- جابجایی شیمیایی.....	۲۷
۱-۲-۴- ناهمسانگردی پوشیدگی شیمیایی.....	۲۷

فصل دوم: نانولوله های بور- فسفید

۱-۲- اهمیت و ضرورت نانو.....	۳۰
۲-۲- نانو چیست.....	۳۰
۱-۲-۲- مواد نانوی یک بعدی.....	۳۱
۲-۲-۲- مواد نانوی دوبعدی.....	۳۱
۳-۲-۲- مواد نانوی سه بعدی.....	۳۲
۳-۲- پیش درآمدی بر نانولوله های بور-فسفید.....	۳۳
۱-۳-۲- نگاهی گذرا بر نانولوله های کربنی.....	۳۴

۳۵	۲-۳-۲- نانولوله‌های غیر کربنی (بور- فسفید)
۳۵	۲-۴- اشاره کوتاه به خواص نانولوله‌های کربنی و غیرکربنی (بور- فسفید)
۳۶	۲-۵- چشم اندازهای نوین کاربرد نانولوله‌ها
۳۶	۲-۵-۱- ترانسزیستورها
۳۷	۲-۵-۲- حسگرها
۳۷	۲-۵-۳- نمایشگرهای گسیل میدانی
۳۸	۲-۵-۴- حافظه‌های نانولوله‌ای
۳۸	۲-۵-۵- استحکام‌دهی کامپوزیت‌ها
۳۸	۲-۶- اشاره کوتاه به روش‌های تهیه نانولوله‌ها
۳۸	۲-۶-۱- روشهای ترکید نانولوله‌ها کربنی
۳۹	۲-۶-۲- روشهای تهیه نانولوله‌ها غیر کربنی
۴۰	۲-۷- انواع نانولوله‌های غرکربنی براساس جهت بردار کایرالیته
۴۱	۲-۸- سلول واحد
۴۲	۲-۹- خواص الکترونی نانولوله‌ها

فصل ۳: اثر دوپه شدن کربن بر پارامترهای NMR بر نانولوله‌های بور- فسفید (BPNT)

۴۴	۳-۱- خلاصه‌ای از مراحل تحقیق
۴۶	۳-۲- روش محاسباتی
۴۷	۳-۳- داده های محاسباتی
۴۷	۳-۳-۱- داده های NMR
۵۱	۳-۳-۲- داده های بار اتمی مولیکن
۵۴	۳-۳-۳- داده‌های ساختاری
۵۷	۳-۳-۴- داده های انرژی و ممان دوقطبی
۵۷	۳-۴- تفسیر و تحلیل داده های دوپه شدن کربن بر نانولوله بور-فسفید
	۳-۴-۱- بررسی داده‌های NMR: پارامترهای تانسورهای جابه جایی (CS) نانولوله های بور- فسفید
۵۷	دوپه شده با کربن در سه مدل (I, II, III) نسبت به مدل کامل (اولیه)
۵۷	۳-۴-۱-۱- جابه جایی شیمیایی CS^I و CS^A برای حالت کامل
۵۸	۳-۴-۱-۲- جابه‌جایی شیمیایی CS^I و CS^A دوپه شده با کربن برای مدل (I)
۵۹	۳-۴-۱-۳- جابه‌جایی شیمیایی CS^I و CS^A دوپه شده با کربن برای مدل (II)

۶۱.....	۳-۴-۱-۴- جابه‌جایی شیمیایی CS^I و CS^A دوپه شده با کربن برای مدل (III)
۶۲.....	۳-۴-۲- بررسی ساختاری نانولوله‌های بور- فسفید دوپه شده با کربن در سه مدل (I, II, III) نسبت به مدل کامل (اولیه)
۶۴.....	۳-۵- جمع بندی نتایج

فصل چهارم: بررسی جذب فیزیکی گاز آرسین در سایت های مختلف بر نانولوله های بور- فسفید

۶۶.....	۴-۱- خلاصه‌ای از مراحل تحقیق
۶۷.....	۴-۲- گاز آرسین
۶۷.....	۴-۲-۱- ستنز گاز آرسین
۶۷.....	۴-۲-۲- علائم و عوارض مسمومیت
۶۸.....	۴-۳- روشهای محاسباتی
۶۹.....	۴-۴- شکل‌های مربوط به جذب مولکول گاز آرسین در محل‌های متفاوت
۷۲.....	۴-۵- داده های محاسباتی
۷۲.....	۴-۵-۱- داده‌های جذب
۷۶.....	۴-۵-۲- نمودارهای جذب فیزیکی گاز آرسین بر سطح نانولوله
۷۷.....	۴-۵-۳- داده های بار
۷۸.....	۴-۵-۴- داده‌های انرژی و ممان دوقطبی
۷۹.....	۴-۵-۵- داده‌های ساختاری
۷۹.....	۴-۵-۶- داده‌های NMR
۸۲.....	۴-۶- تفسیر و تحلیل داده‌های جذب گاز آرسین بر نانولوله بور-فسفید
۸۲.....	۴-۶-۱- بررسی داده‌های جذب
۸۳.....	۴-۶-۲- بررسی داده‌های بار
۸۳.....	۴-۶-۳- داده‌های انرژی و ممان دوقطبی
۸۳.....	۴-۶-۴- داده‌های ساختاری
۸۳.....	۴-۶-۵- بررسی داده‌های NMR
۸۴.....	۴-۷- جمع بندی نتایج
۸۴.....	منابع

مقدمه:

علوم نانو و فناوری نانو بیانگر رهگذری به سوی دنیایی جدید هستند. سفر به اعماق سرزمین اتم‌ها و مولکول‌ها نوید دهنده اثرات اجتماعی شگفت‌انگیزی است، می‌توان گفت که تغییرات در مقیاس نانومتری بر خواص موج گونه الکترون‌های درون مواد اثر می‌گذارد. لذا با جابه جا کردن اتم‌ها در این مقیاس می‌توان خواص اصلی مواد (به عنوان مثال دمای ذوب، اثرات مغناطیسی، ظرفیت بار) را بدون تغییر کلی ترکیب شیمیایی مواد دگرگون ساخت. بنابراین پیش‌بینی رفتار و خواص در محدوده‌ای از ابعاد برای نانوتکنولوژیست‌ها حیاتی است.

کشف نانولوله‌های کربنی توسط Iijima منجر به مطالعات زیادی بر روی خواص و کاربردهای این مواد جدید شده است. کاربردهای نانولوله‌های کربنی (CNTs) گستره وسیعی از نانو الکترونیک‌ها در نانوبیوتکنولوژی را در بر می‌گیرد. اگر چه به واسطه‌ی رسانایی و نیمه‌رسانایی که بستگی به قطر نانولوله و کایرالیته CNTs دارد، سنتز CNTs برای هدف‌های، مطلوب کار سختی است، به همین دلیل تلاش قابل توجهی برای سنتز نانولوله‌های غیرکربنی با خواص که به قطر نانولوله و کایرالیته آن بستگی ندارد صورت گرفت. نانولوله‌های گروه ۳- فسفیدها به خصوص بور- فسفید (BPNTs) همیشه رفتار نیمه‌رسانایی دارند.

بور و فسفید اولین همسایه‌های اتم کربن در یک دوره از جدول تناوبی هستند و مجموع تعداد الکترون‌های یک اتم بور و یک اتم فسفر برابر تعداد الکترون‌های اتم کربن است. بنابراین علاوه بر ویژگی نیمه‌رسانایی آنها، تشابه در تعداد الکترون‌های BPNTs و CNTs باعث شده که موضوع جالبی برای تعدادی از مطالعات باشد. پایداری ساختار یک بعدی BPNTs برای اولین بار به وسیله سایچ محاسبات تئوری تشخیص داده شد. از جالبترین نانولوله‌های غیرکربنی نانولوله‌های بور- فسفید می‌باشند.

نانولوله‌های بور- فسفید خالص عمدتاً عایق هستند و باند گپ الکترونیکی پهنی دارند. با دوپه کردن یا همان ایجاد نقص در نانولوله‌های بور- فسفید خواص الکترونیکی این ترکیبات بهبود پیدا می‌کند و باند گپ الکترونیکی آنها کاهش می‌یابد. همچنین ایجاد نقص روی خواص الکترواستاتیکی این نانولوله‌ها تاثیر می‌گذارد.

وجود نقص در نانولوله‌های بور- فسفید می‌تواند باعث کاربردهای بسیاری از جمله کاربردهای نوری و مغناطیسی شود. ما در موضوع اول کتاب با دوپه کردن " کربن " نقصی در نانولوله بور- فسفید زیگزاک (۶،۰) ایجاد کردیم تا تاثیر این نقص را بر ساختار الکترونی، باند گپ الکترونیکی و بر پارامترهای NMR این ترکیبات مورد بررسی قرار دهیم. نانولوله‌های آلاینده، از نوعی که ما مطالعه کردیم می‌توانند کاربردهای بهتری در جذب گازهای مختلف داشته باشند.

اسپکتروسکوپی رزونانس مغناطیسی هسته (NMR) یکی از تکنیک‌های متنوع برای مطالعه‌ی خواص فیزیکی مواد است. جابه‌جایی شیمیایی (CS) در سایت‌هایی از هسته‌های ^{11}B و ^{13}P به دانسیته‌ی الکترونی در سایت‌های این هسته‌ها حساس هستند و تغییراتی را که باعث اختلال می‌شوند، احساس می‌کنند. هدف از این تحقیق بررسی تئوری دوپه شدن "کربن" (Carbon) و همچنین تاثیر قرار گرفتن این کربن در مدل‌های متفاوت بر روی

پارامترهای رزونانس مغناطیسی هسته (NMR) و تاثیر آن بر تانسورهای پوشیدگی شیمیایی برای هر یک از هسته‌های ^{31}P و ^{11}B می‌باشد.

مدل‌های مورد مطالعه در این تحقیق شامل؛ مدل کامل و مدل‌های دوپه شده با کربن (I)، (II) و (III) است. پس از انجام محاسبات بهینه‌سازی در سطح تئوری $\text{B}^2\text{LYP}/6-311\text{G}^{**}$ ، تانسورهای شیمیایی در سایت‌های مختلف هسته‌های ^{31}P و ^{11}B در هر یک از سه شکل بهینه شده از نانولوله‌های بور-فسفید بر پایه‌ی روش GIAO بدست آمد. محاسبات مربوط به پارامترهای NMR در سطح تئوری $\text{B}^2\text{LYP}/6-311++\text{G}^{**}$ انجام شده است.

در موضوع دوم در بررسی محاسباتی انجام شده با روش تابعیت چگالی (DFT) در سطح تئوری $\text{B}^2\text{LYP}/6-311\text{G}^{**}$ جذب فیزیکی گاز آرسین را از سر آرسینیک و هیدروژن بر روی سطح خارجی نانولوله ی بور-فسفید (۶،۰) مورد مطالعه قرار داده‌ایم. در این مطالعه مولکول آرسین را به سطح خارجی نانولوله در فواصل و سایت‌های مختلف نزدیک کرده‌ایم و انرژی جذب را برای این حالت‌ها بدست آوردیم و با توجه به انرژی‌های جذب بدست آمده، بهترین حالت جذب مشخص شد.

آرسین یا AsH_3 یکی از ترکیبات به شدت سمی است این گاز در سال ۱۷۷۵ توسط کارل اسکیل کشف شد. او با کاهش اکسید آرسینیک (III) با روی و حضور اسید این گاز را تولید کرد. یکی از خطرناک‌ترین ترکیبات آرسینیک که اثرات حاد و کشنده دارد، آرسین است که از ترکیب آرسینیک و هیدروژن حاصل می‌شود. تعداد زیادی از فلزات، مانند روی و آهن مقداری ناخالصی از آرسین دارند و اگر این فلزات به‌صورت پودر با اسید کلریدریک مجاور شوند، گاز آرسین ایجاد خواهد شد. آرسین، بوی سیلری سیر دارد.

عوارض مسمومیت با این گاز معمولاً چند ساعت بعد از تماس با آن خود را نشان خواهند داد؛ شخص دچار ناراحتی عمومی، ضعف و سپس دردهای شدید معده می‌گردد. سمیت این گاز و همچنین اثرات مخرب آن ما را براین داشته که جذب این گازها را بر روی نانولوله‌ها به خصوص نانولوله‌های بور-فسفید مورد بررسی قرار دهیم. با استفاده از نرم افزار گوسین ابتدا مولکول آرسین و نانولوله‌ی بور-فسفید را به طور جداگانه در سطح تئوری $\text{B}^2\text{LYP}/6-311\text{G}^{**}$ بهینه کرده‌ایم. سپس جذب فیزیکی مولکول آرسین را در فواصل و سایت‌های مختلف نانولوله‌ی بور-فسفید مورد بررسی قرار داده‌ایم و انرژی‌های جذب را با استفاده از مدل زیر بدست آورده‌ایم:

$$E_{\text{ads}} = E_{\text{nanotubeBP} + \text{AsH}_3} - [(E_{\text{nanotubeBPghost}} - \text{AsH}_3) + (E_{\text{nanotubeBP} - \text{AsH}_3\text{ghost}})]$$